

el Enlace de Valencia (TEV)

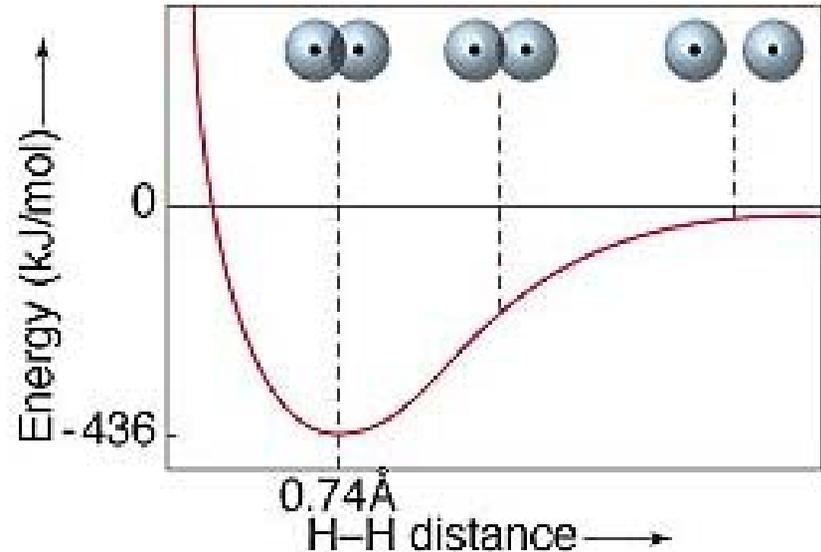
s Fundamentales.

n a moléculas sencillas.

on de Orbitales Atómicos.

oléculas poliatómicas con enlace sencillo.

oléculas con enlaces dobles y triples.



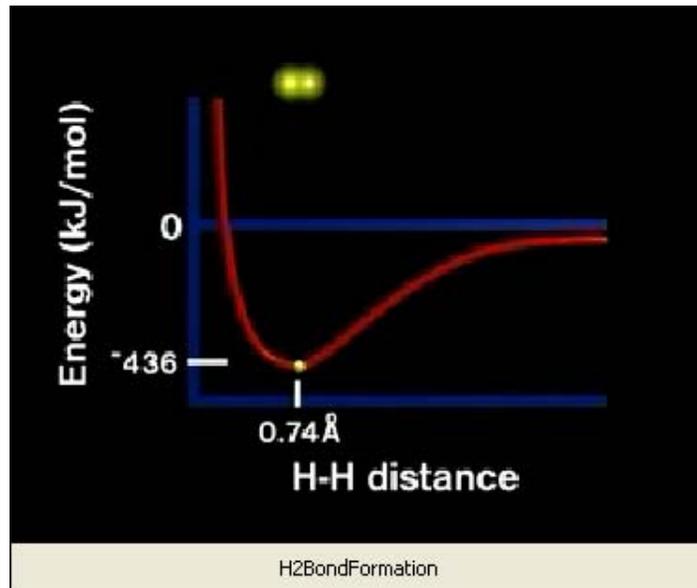
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
...
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Conceptos Fundamentales

¿Cómo se forman los enlaces?

¿Es posible predecir la fuerza y distancia de enlace?

¿Qué ocurre con dos átomos que se aproximan? ¿Llegan a enlazarse?



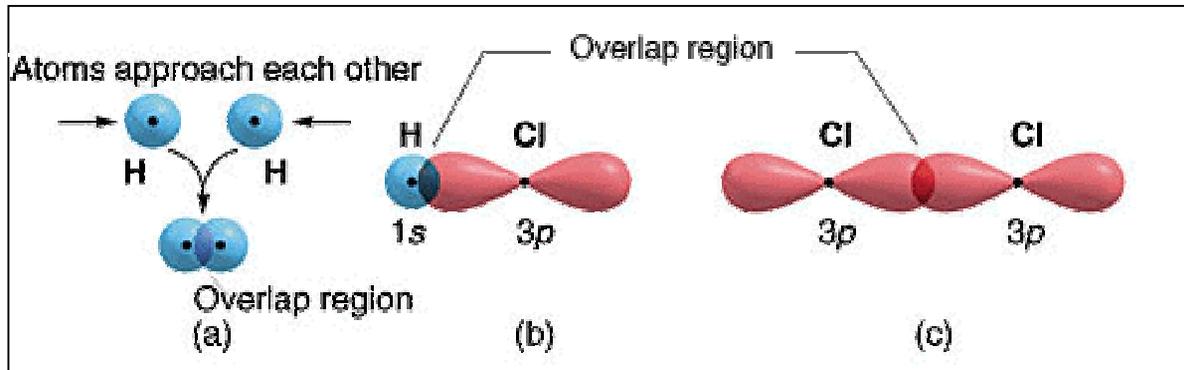
de Lewis y la RPECV NO pueden responder a estas preguntas.

MECÁNICA CUÁNTICA y ORBITALES ATÓMICOS

Enlace de Valencia (TEV): combina la idea de compartición electrones entre dos átomos enlazados y el concepto de orbitales atómicos.

se produce por **solapamiento** de dos orbitales atómicos de diferentes tipos, ocupados por un electrón: **ENLACES LOCALIZADOS**

Enlace de Valencia: dos orbitales y sus electrones comparten una región localizada en el espacio entre los dos núcleos.

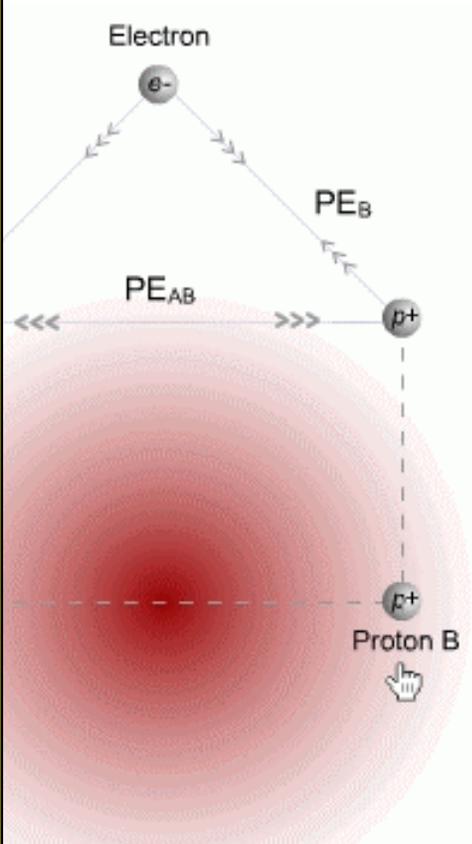


Como resultado de solapamiento los orbitales atómicos (funciones de onda) se combinan para formar un orbital molecular: **reforzamiento de densidad electrónica entre los núcleos.**

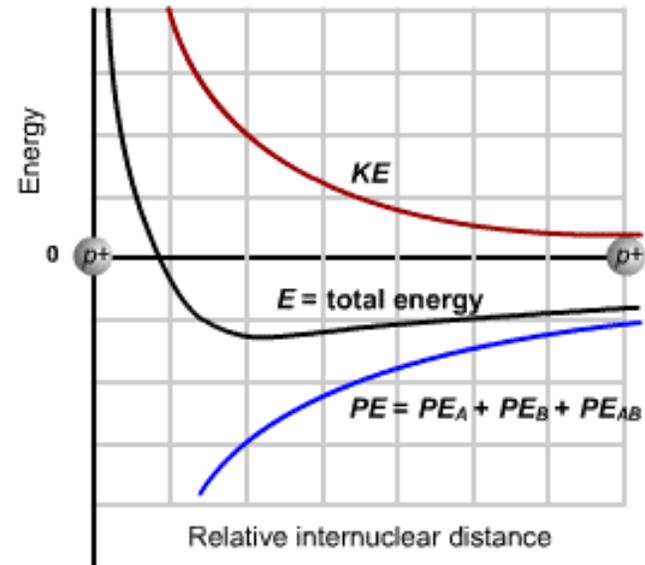
ómo el solapamiento de orbitales une dos átomos?

+ (se considera un único electrón compartido por simplicidad)

l sistema cuando el electrón está entre los núcleos enlazados.

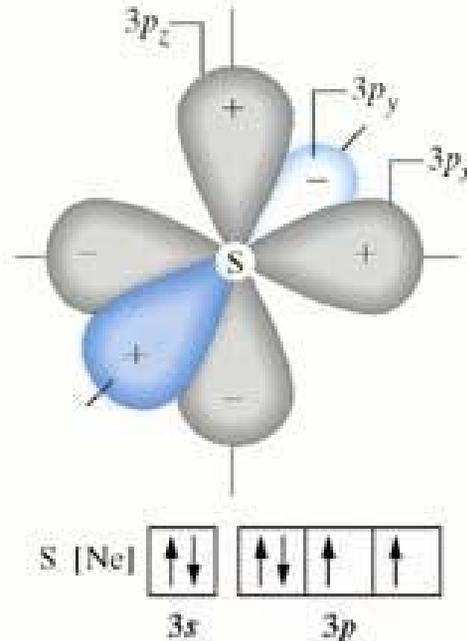
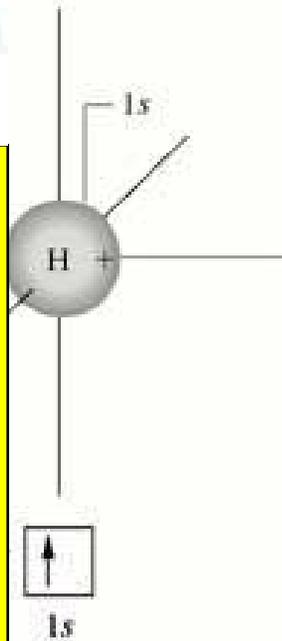


Se alcanza un **mínimo de energía** que asegura la **formación de la molécula**

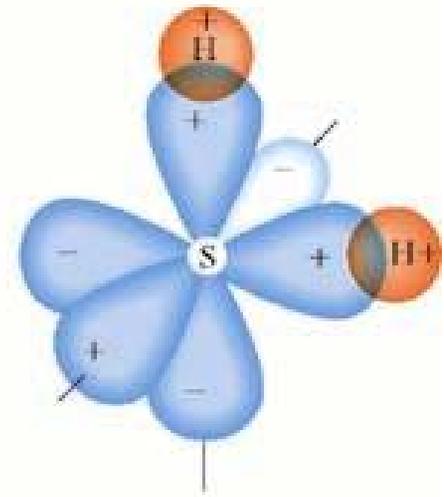


Aplicación a moléculas sencillas

Átomos separados



Enlaces covalentes



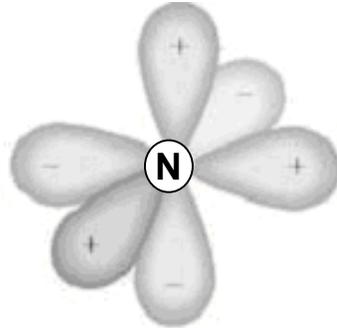
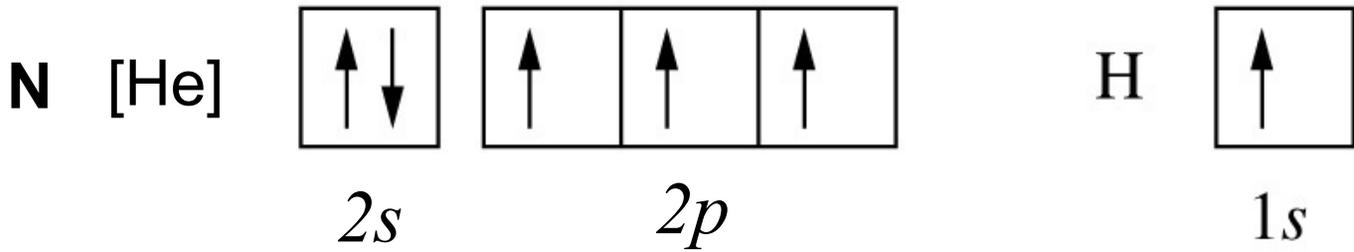
o H-S-H de 90° (exp. 92°)

¿Previsión RPECV?

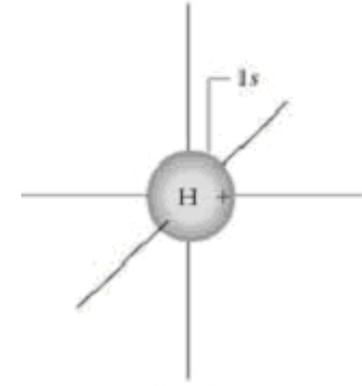
¡¡ ángulo H-S-H de 109.5° !!

E₂

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



Orbitales enlazantes del átomo N

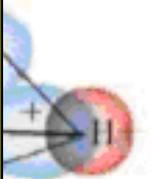


Ángulo H-N-H de 90° (exp. 107°)

¿Previsión RPECV?

AB_3E_1

¡¡ ángulo H-N-H de 109.5° !!

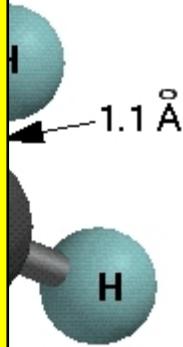


formados

Hibridación de Orbitales Atómicos

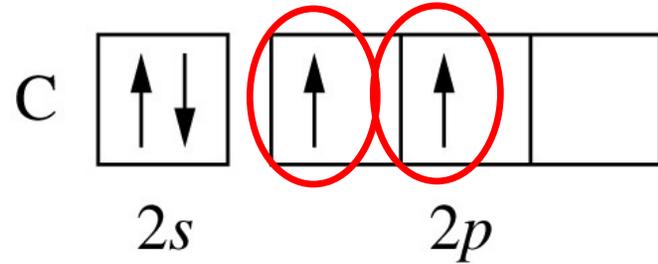
Explicar el concepto de solapamiento de orbitales a moléculas poliatómicas, en los casos es necesario introducir modificaciones a la TEV sencilla para la geometría molecular

ejemplo)



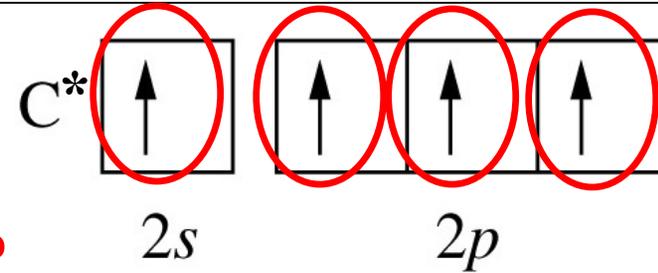
Estado fundamental

Dos enlaces C-H
ángulos H-C-H 90°



Estado excitado

Cuatro enlaces C-H
tres ángulos H-C-H 90°



Hibridación de Orbitales Atómicos

Hibridación de Orbitales Atómicos

combinación **lineal** de orbitales atómicos puros de **un mismo átomo** para formar un conjunto nuevo de **orbitales atómicos equivalentes híbridos**

Reglas para la Hibridación

El número de O.A. **híbridos** que construimos es **igual** al número de O.A. que se combinan.

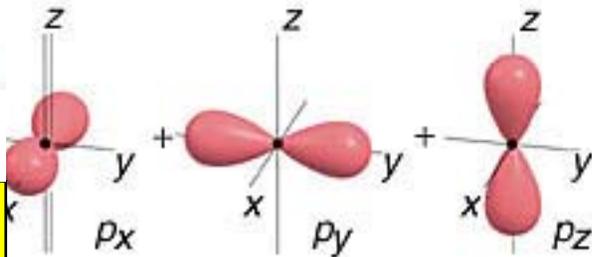
El conjunto de **O.A. híbridos es energéticamente equivalente a los O.A.** de los que provienen. Se conserva el centro de gravedad de los orbitales en el proceso de hibridación.

Para "promover" los electrones en los nuevos O.A. híbridos el átomo puede encontrarse en un estado más energético que usando O.A. puros. A ésta diferencia de energía se le llama **energía de promoción**.

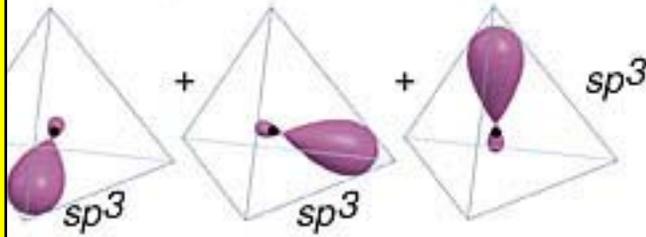
La **geometría molecular** le corresponde un **esquema** distinto de hibridación.

Hibridación sp^3

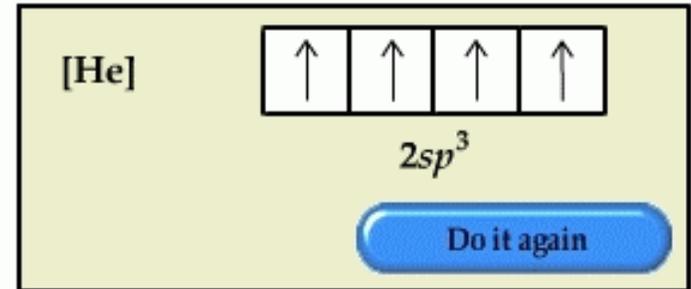
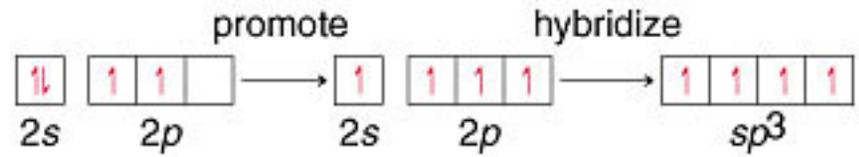
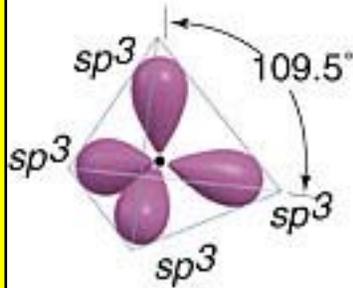
Atomo de C



to form four sp^3 hybrid orbitals

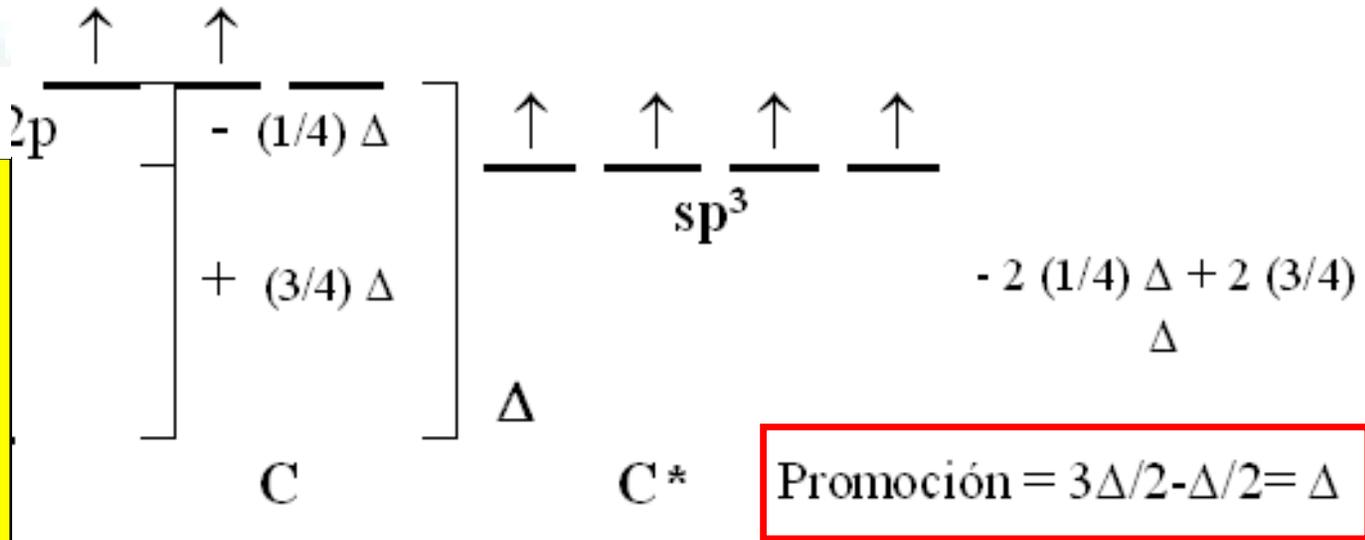


together (large lobes only)



CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVIA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

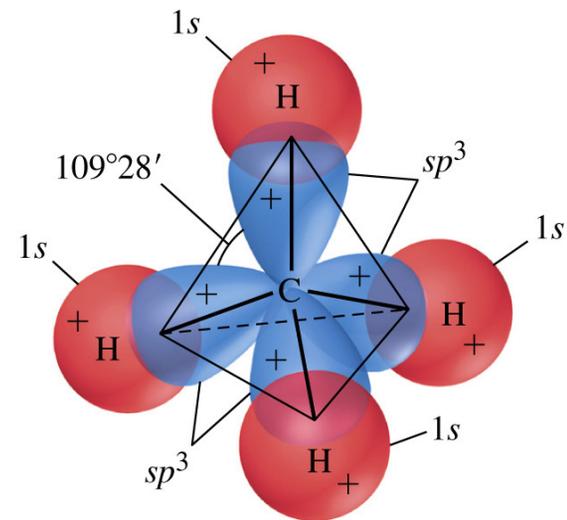
Energía de promoción para la hibridación sp^3 del átomo de C



de orbitales híbridos supone un aporte (energía de promoción)

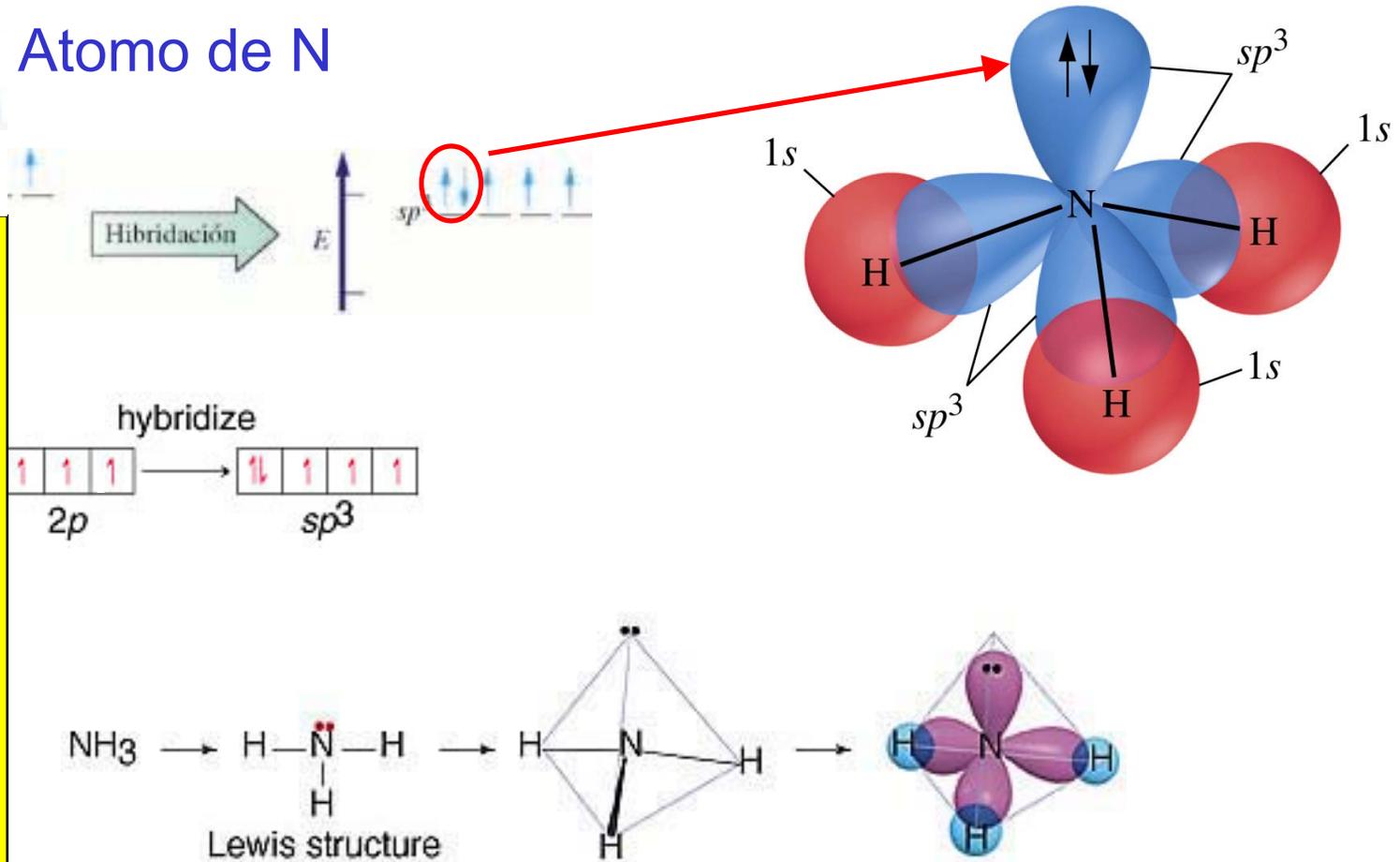
de CUATRO enlaces C-H bien dirigidos (energía)

CH_4 es una molécula estable



niaco)

Atomo de N



Ángulos H-N-H de 107°

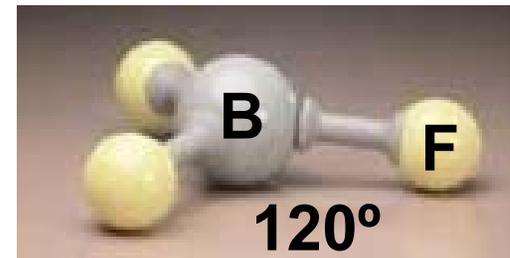
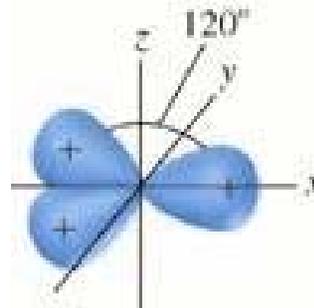
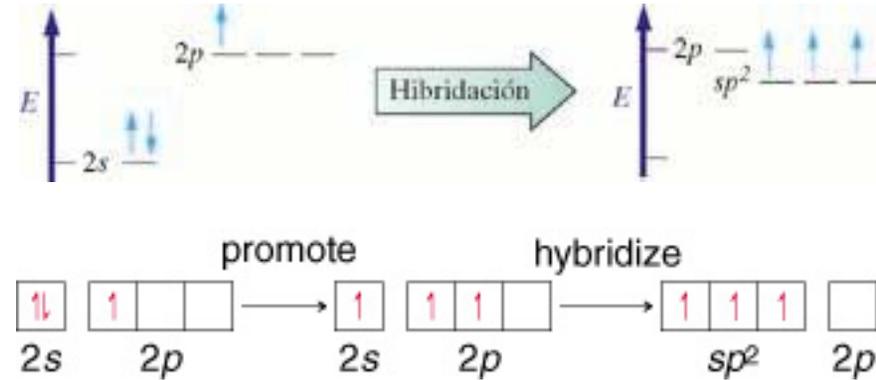
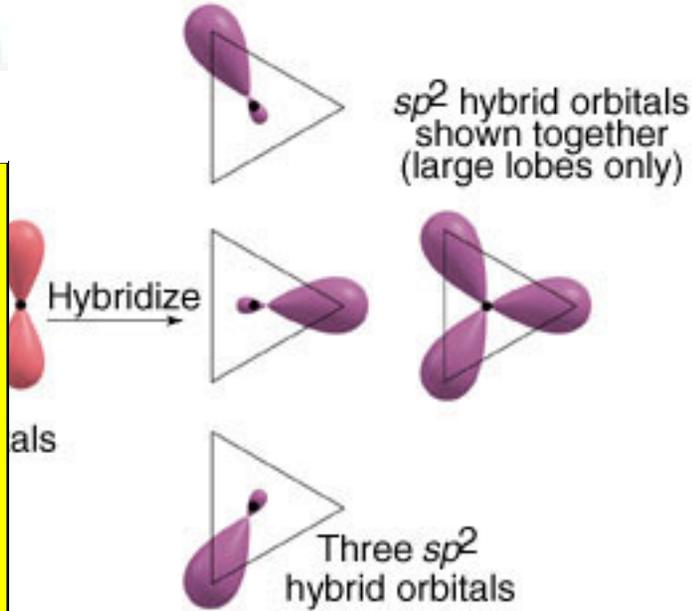
(ángulos H-N-H previstos RPECV de 109.5°)

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Hibridación sp^2

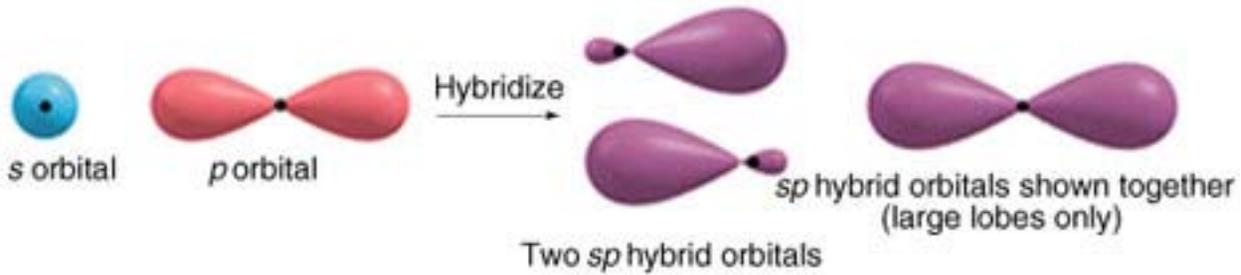
BF_3 (trifloruro de boro)

Atomo de B

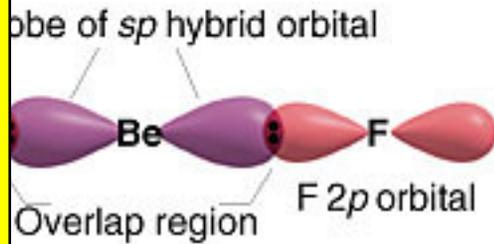


CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Hibridación sp



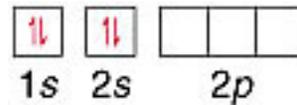
(difloruro de breilio)



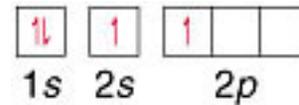
Atomo de Be



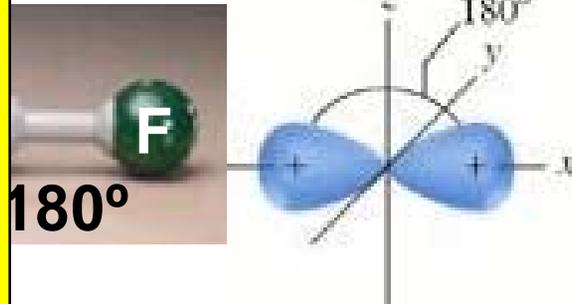
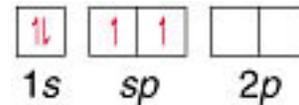
Configuración



Promoción



Hibridación



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

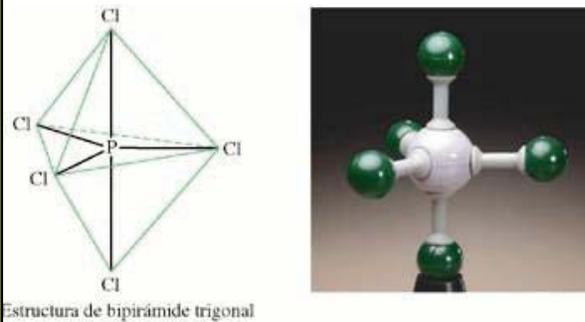
Orbitales híbridos sp^3d y sp^3d^2

Los del **TERCER periodo en adelante** no siempre es posible explicar la estructura molecular considerando únicamente hibridación de orbitales s y p.

Hay que **incluir orbitales d** en los esquemas de **hibridación** para explicar la estructura de moléculas con geometrías de **bipirámide-triangular** y **octaédrica** o similares.

Hibridación sp^3d

(Pentacloruro de fósforo)



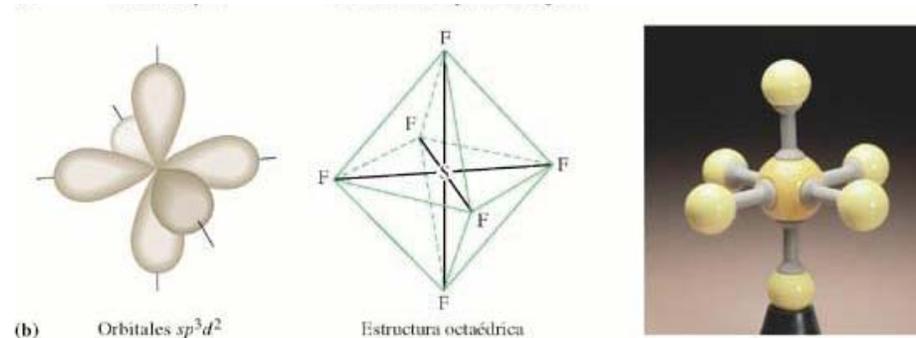
Estructura de bipirámide trigonal

3s	↑	↑				
3p						
3d						

Do it again

Hibridación sp^3d^2

(Hexafluoruro de azufre)



(b) Orbitales sp^3d^2

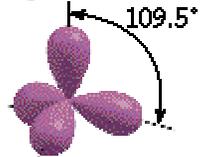
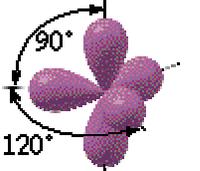
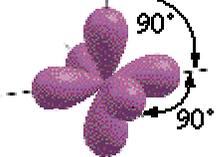
Estructura octaédrica

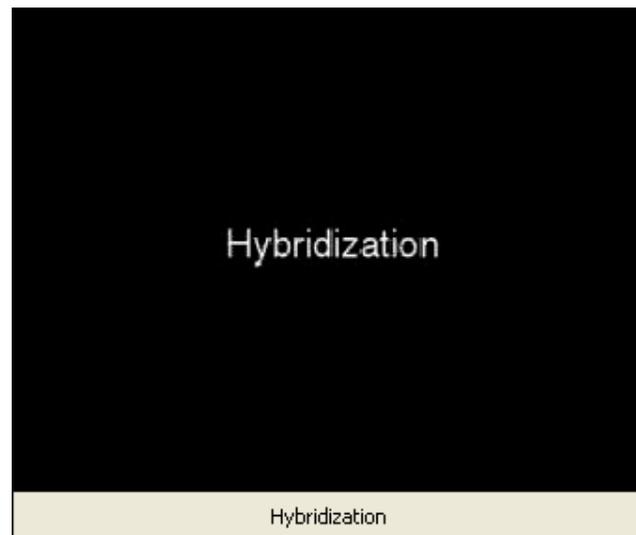
[Ne]	↑	↑	↑	↑	↑	↑			
3s									
3p									
3d									

Do it again

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Clasificación de Orbitales Atómicos y la teoría RPECV

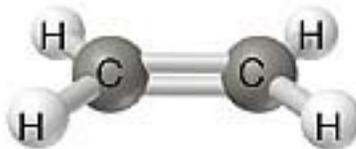
Arrangements Characteristic of Hybrid	
Geometry	Examples
 <p>180° Linear</p>	BeF ₂ , HgCl ₂
 <p>120° Trigonal planar</p>	BF ₃ , SO ₃
 <p>109.5° Tetrahedral</p>	CH ₄ , NH ₃ , H ₂ O, NH ₄ ⁺
 <p>90° 120° Trigonal bipyramidal</p>	PF ₅ , SF ₄ , BrF ₃ , SbCl ₅ ²⁻
 <p>90° 90° Octahedral</p>	SF ₆ , ClF ₃ , XeF ₄ , PF ₆ ⁻



- 1.- Escribir una **estructura de Lewis** aceptable.
- 2.- Utilizar la teoría **RPECV** para **predecir la geometría** probable de los pares de electrones estereoactivos.
- 3.- Seleccionar el **esquema de hibridación** correspondiente a la geometría de los pares de electrones estereoactivos.

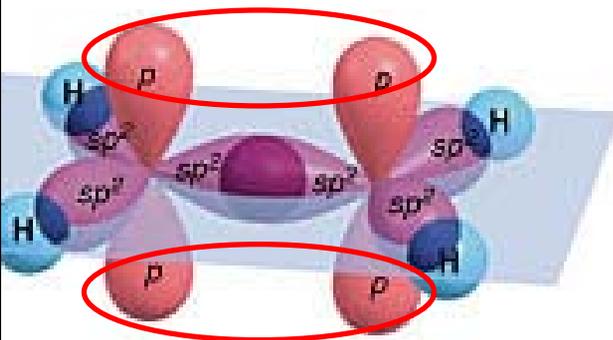
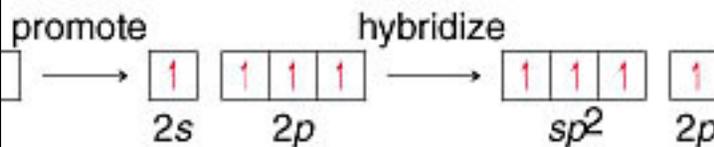
Moléculas con enlaces dobles y triples

ileno)

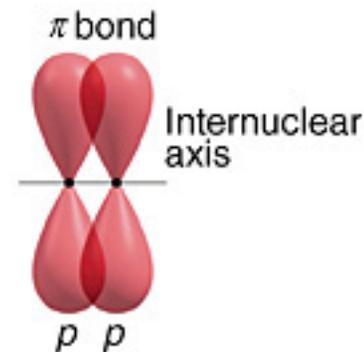


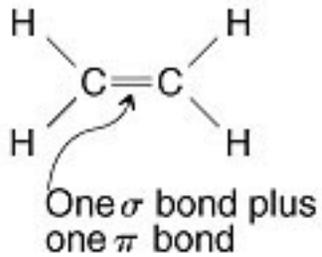
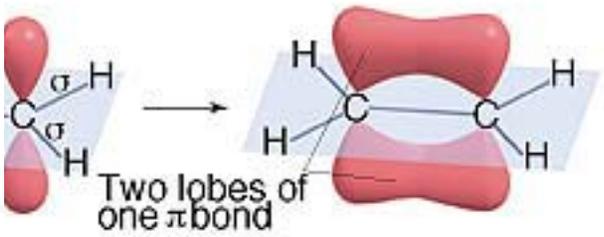
tiene un enlace doble carbono-carbono en su estructura de Lewis. El PECEV trata cada átomo de C como si estuviera rodeado por tres electrones en una ordenación trigonal-plana.

Orbitales frontales: enlaces tipo σ



Solapamiento lateral:
enlace tipo π

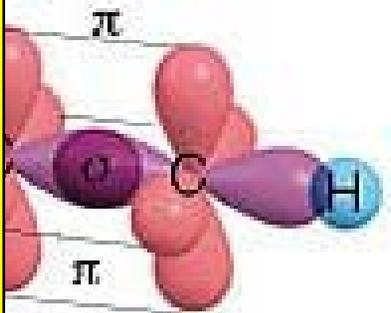
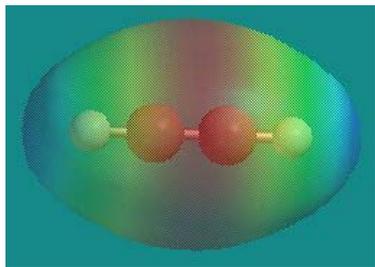




acetileno)

no, C_2H_2 , tiene un enlace *triple*.

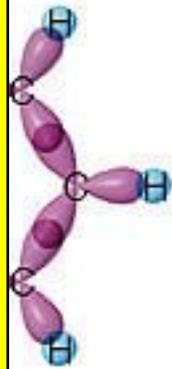
RPECV dice que la molécula es lineal.



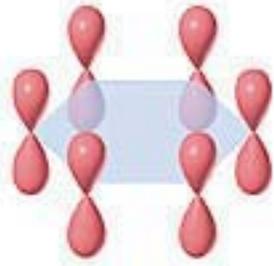
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Enlaces π deslocalizados

H_6 (benceno)



ds



(b) 2p atomic orbitals

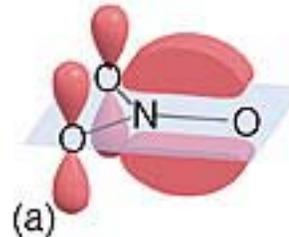
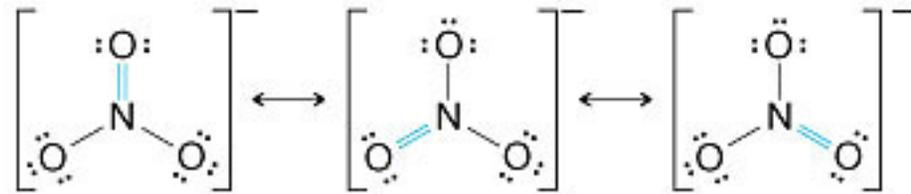


(b) Localized π bonds

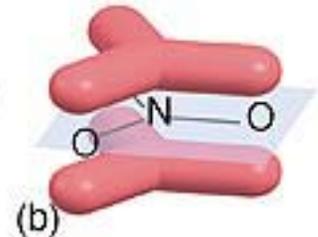


(c) Delocalized π bonds

NO_3^- (nitrato)



(a)



(b)

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVIA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70